DOI: 10.22067/jacsm.2022.74654.1087 *https://mechanic-ferdowsi.um.ac.ir/?lang=en*

Investigating the Effects of Geometric Defects and Temperature Changes on the Fracture Behavior of Boron Carbide Monocrystalline Structure by Molecular* Dynamics

Alireza Albooyeh[*,1], Ali Dadrasi[2]
Mohammadamin Razavikia[3]

1. Introduction

The discovery of graphene with a hexagonal structure in 2004 attracted the attention of researchers to two-dimensional structures such as boron nitride, phosphorus, silica, graphene, etc. Boron carbide (BC_3), with low density and special mechanical properties, has applications in industry such as the production of abrasives, armor, thermoelectrics, and neutron detectors. This two-dimensional structure was identified by Tanaka et al. through epithelial growth at NbB_2 levels. This structure has been introduced as the hardest material after diamond and cubic boron nitride. Moreover, the composites of this ceramic have high strength, low hardness, and low specific gravity. The mentioned properties make BC_3 a suitable option for experimental studies and simulations.

This is a numerical study on the two-dimensional structure of BC_3 based on molecular dynamics simulations. Mechanical properties including Young modulus, stress, and strain at break point were calculated. The effects of circular defect position with a fixed radius at different locations of the structure were studied. Moreover, the influence of increasing the temperature from 100 to 1000 K on the mechanical properties of the structure was investigated.

2. Calculation methods

In this study, molecular dynamics simulations in Lampes software were used to measure the mechanical properties of BC_3. The zigzag and armature directions were considered along the X and Y axes, and the Tressof potential was used to depict the interactions between boron and carbon atoms, as well as the interaction of bonds. Moreover, the circular defects and temperatures changes as two effective elements on the mechanical properties were investigated. During the simulation, structures were balanced under NPT conditions and an integrated plate with dimensions of 200A × 200A with 13376 atoms was formed and put under axial tensile loading.

3. Results and discussion

The effect of circular defect position

A circular defect with a radius of 15 angstroms was created in five positions on the structure containing 33, 66, 100, 133 and 166 angstroms. Figure 1 shows a schematic of the circular defect and its position at the center of the boron carbide structure.

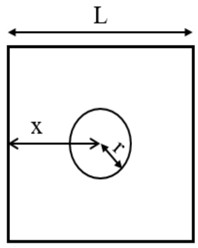


Figure 1. A schematic of the circular defect and its location at the center of the BC_3 structure

The structure was put under tensile loading at 300K. Figure 2 shows the stress-strain diagram in the presence of a defect in five positions. The results showed that the lowest amount of mechanical properties occured in the case of a circular defect at the center of the BC_3 plate (X_{100}) and the highest amount happend in the X_{166} position. The value of the Young modulus has risen from 741.01 GPa in the X_{66} position to 749.04 GPa in the X_{166} position, indicating an increase of 1.08%. This increasing bahavior is also observed for stress and strain properties at the breaking point. It should be noted that at high stresses, defects with energy gain cause the atoms to become out of their steady state and the growth of the defect occurs.

* Manuscript received: Junery,10 , 2022; Revised, April , 4 , 2022, Accepted, April, 27 , 2022.
[1] Corresponding author. Assistant Professor, School of Engineering, Damghan University, Damghan, Iran.
Email: a.albooyeh@du.ac.ir
[2] Assistant Professor, Mechical Engineering, Azad Shahrood University, Shahrood, Iran.
[3] BSc. Student, School of Engineering, Damghan University, Damghan, Iran.

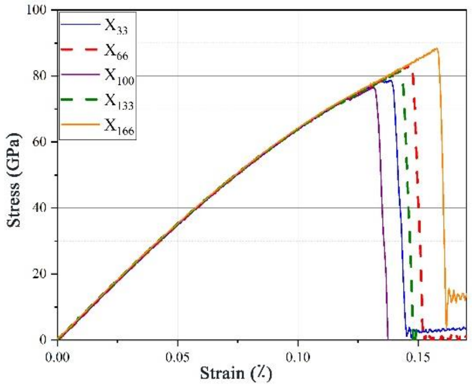


Figure 2. Stress-strain diagram of BC_3 on zigzag direction and five circular defect position

The influence of temperature with fixed position of circular defect

Given that in the previous section, the best results were observed in the X_{166} position, the structure with this defect position was examined at five temperatures of 100, 200, 300, 700, and 1000 K. Figure 3 shows the changes in stress and Young modulus with respect to temperature.

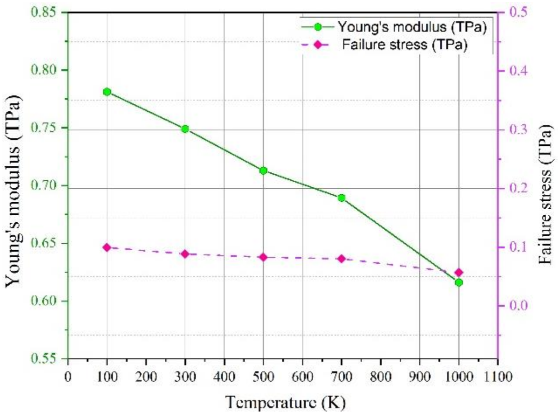


Figure 3. The changes in Young modulus and stress at the breaking point of BC_3 structure for different temperatures

The results showed that the mechanical properties decreased with increasing temperature. The values of Young modulus has risen from 781.21 GPa for temperature of 100K to 749.49, 712.98, 689.33 and 616.19 GPa for temperatures of 300, 500, 700 and 1000 K, which shows a decrease of 4.11%, 8.73%, 11.76%, and 21.12%, respectively. The value of stress at break point decreased from 99.59 GPa at temperature of 100 K to 56.71 GPa at 1000 K, which indicated a decreasing percentage of 57.61%.

Figure 4 shows the failure process of a carbide structure with a defect in the X_{166} position at three different temperatures. It can be seen that with increasing strain, the concentration of stress around the defect increases, which causes failure in the structure.

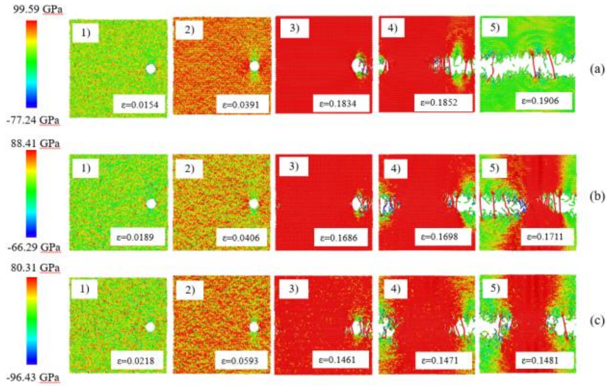


Figure 4. Crack propagation scenarios theoretically captured for BC_3 structure at (a) 100K , (b) 300K, (c) 700K for constant circular defects on X_{166}

4. Conclusion

In this study, the mechanical properties of two-dimensional structure of BC_3 in the zigzag direction were investigated. Circular defect position and temperature changes as two affacting elements on the Young modulus, failure stress, and strain were studied. The results showed that the presence of a circular defect changes the mechanical properties. As its location approached the center of the structure from the edges, the mechanical properties decreased. The effect of five different temperatures of 100 K to 1000 K was investigated. The results showed a decrease of 21.12% in the Young modulus. Moreover, the amount of failure stress and strain of 1000 K was reduced by 43.05% and 46.19% compared to 100 K, respectively.

https://mechanic-ferdowsi.um.ac.ir
DOI: 10.22067/jacsm.2022.74654.1087

بررسی تأثیر عیوب هندسی و تغییرات دما بر رفتار شکست ساختار مونوکریستال کاربید بور به‌روش دینامیک مولکولی *

مقالهٔ پژوهشی

علیرضا آلبویه[۱]	علی دادرسی [۲]	محمّد امین رضوی‌کیا[۳]

چکیده *کاربید بور (BC_3) یکی از مواد دوبعدی نوظهور می‌باشد که خواص شیمیایی، مکانیکی و حرارتی منحصر به فردی را به نمایش گذاشته‌است. در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار کاربید بور با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. بااستفاده از پتانسیل ترسوف و شرایط مرزی دوره‌ای، دو المان جایگاه نقص دایروی و تغییرات دما بر ساختار کاربید بور مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. نتایج به‌دست‌آمده از شبیه‌سازی تست کشش بر ساختار کاربید بور نشان داد که کم‌ترین مقدار مدول یانگ و نیز تنش و کرنش در نقطهٔ شکست در نمونهٔ دارای نقص در مرکز ساختار اتفاق افتاد. هم‌چنین با تغییر جایگاه نقص به‌سمت لبه‌ها، خواص مکانیکی افزایش یافت. با تغییر جایگاه نقص از مرکز ساختار به لبه‌ها، مقادیر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست و راستای زیگزاگ به‌ترتیب ۱/۲۹٪، ۱۵/۱٪ و ۲۰٪ افزایش یافت. بررسی تغییرات دما از ۱۰۰ کلوین تا ۱۰۰۰ کلوین نشان داد که افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شد، به‌طوری‌که مقدار مدول یانگ از ۷۸۱/۲۱ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ٦١٦/١٩ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافت. هم‌چنین، مقدار تنش و کرنش در نقطهٔ شکست برای تغییرات دما، نسبت‌به دمای ۱۰۰ کلوین ذکر شده به‌ترتیب ٤٣/٠٤٪ و ٤٥/٨٨٪ کاهش یافت.*

واژه‌های کلیدی دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی، شبیه‌سازی، کاربید بور، نقص مکانیکی.

مقدمه

با کشف مواد دوبعدی، مانند مواد تک‌لایه‌ای که ضخامت آن‌ها اندازهٔ یک اتم یا سلول است، تحقیقات در مقیاس نانو بر روی این ساختارها آغاز شد. نانومواد دوبعدی، نیازهای گسترده‌ای از صنعت را مرتفع کردند و طیف گسترده‌ای از طراحی مواد را به خود اختصاص دادند. از جمله ساختارهای دوبعدی شناخته شده می‌توان به بور نیترید [1]، فسفرین [2] ، سیلیس [3] ، گرافن [4] و... اشاره کرد. در سال ۲۰۰٤، کشف گرافن با ساختار شش‌وجهی توجه محققان را به ساختارهای دوبعدی معطوف کرد [5]. گرافن از روش‌های مختلفی سنتز می‌شود که لایه‌برداری مکانیکی، لایه‌برداری شیمیایی و رسوب بخار شیمیایی از جملهٔ آن‌ها می‌باشد [6]. این ساختار سبک و انعطاف‌پذیر، با خواص مکانیکی [7]، هدایت گرمایی [8] و الکتریکی [9] کم‌نظیر، کاندیدای مقبولی برای کاربردهای متعدد صنعتی و تحقیقاتی است.

دینامیک مولکولی یک آزمایشگاه مجازی مناسب و قدرتمند برای شبیه‌سازی است. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پارامترهایی نظیر فشار، دما، پتانسیل و... بر روی ساختار مورد آزمایش کنترل و پس از رسیدن به تعادل و پایداری نسبت‌به زمان، ساختار تولید می‌شود. در دینامیک مولکولی حرکت اتم‌ها و مولکول‌ها و تغییرات آن‌ها نسبت‌به زمان بررسی می‌شود. با این روش، می‌توان ساختارهایی چون نانولوله‌ها، ساختارهای دوبعدی و سه‌بعدی، پلی‌کریستال‌ها و... را در مقیاس نانو و مایکرو شبیه‌سازی کرد و خواص مختلف آن‌ها شامل خواص مکانیکی، ارتعاشی، الکتریکی، رسانش حرارتی، اپتیکی و... را اندازه‌گیری کرد [10-13].

کاربید بور، با چگالی کم و خواص مکانیکی ویژه، در صنعت کاربردهایی چون تولید مواد ساینده [14]، زره‌پوش [15]، ترموالکتریک [16] و آشکارسازی‌های نوترونی را دارد [17]. این ساختار دوبعدی در سال ۲۰۰۵ توسط تاناکا و همکاران، از طریق رشد هم‌بافته در سطوح NbB_2 شناسایی شد [18]. این ساختار، سخت‌ترین ماده بعد از الماس و نیترید بور مکعبی معرفی شده‌است [19]. هم‌چنین کامپوزیت‌های این سرامیک، علاوه‌بر مقاومت و سختی بالا، وزن مخصوص پایینی دارند. خواص ذکر شده، کاربید بور را به گزینهٔ مناسبی برای مطالعات تجربی و

---

* تاریخ دریافت مقاله ۱٤۰۰/۱۰/۲۰ و تاریخ پذیرش آن ۱٤۰۱/۲/۷ می‌باشد.

(۱) نویسندهٔ مسئول: استادیار، مهندسی مکانیک، دانشکدهٔ فنی و مهندسی، دانشگاه دامغان.	**Email**: a.albooyeh@du.ac.ir
(۲) استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد شاهرود.
(۳) دانشجوی کارشناسی، مهندسی مکانیک، دانشکدهٔ فنی و مهندسی، دانشگاه دامغان.

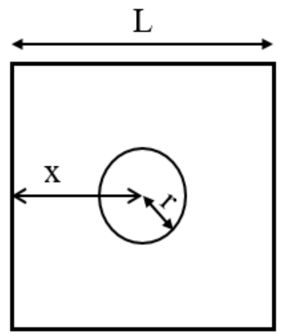
شبیه‌سازی‌ها تبدیل کرده‌است. دوراندوردو [20] خواص مکانیکی و الکتریکی کاربید بور آمورف را بااستفاده از دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کرد. در این تحقیق کاربید بور غیربلوری به‌عنوان یک نیمه‌رسانا معرفی شد. مردول و همکاران [21] در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، وابستگی‌های دمایی و ترمودینامیکی و خواص ساختاری تک‌لایه کاربید بور را بررسی کردند. نتایج نشان داد، ضریب انبساط حرارتی خطی به‌دلیل برانگیختگی حالت‌های خمش خارج از صفحه با فرکانس پایین، در یک محدودهٔ دمایی، مقداری منفی است. کروتایف و همکاران [22] تغییرات ساختار کاربید بور را تحت تنش‌های غیرهیدرواستاتیک مطالعه کردند. در طی این شبیه‌سازی، سه تغییر ساختاریِ خم شدن ناگهانی زنجیرهٔ سه اتمی، بی‌نظمی ساختار و تغییر در تقارن بلوری مورد بحث قرار گرفت. خمش ناگهانی ۴۰ گیگاپاسکالی در اثر وجود تغییرشکل ویژه رخ داد، درحالی‌که در بارگذاری شبه‌استاتیک، ساختار مورد آزمایش تا ۷۰ گیگاپاسکال پایدار ماند. هم‌چنین نقص کریستالی مقدار آستانهٔ تنش را کاهش داد. در مقاله‌ای دیگر خادمی زاهدی و همکاران [23] خواص مکانیکی کاربید بور دوبعدی را مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها دو نوع صفحه در حضور نقص و عدم حضور نقص را در دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کردند. هم‌چنین دو نقص ترک و دایره در دماهای متفاوت تحت بار محوری قرار گرفت. مقدار مدول یانگ در دمای ۲ کلوین در راستای آرمچیر ۷۷۹/۴۳ گیگاپاسکال و در راستای زیگزاگ ۸۱۵/۰۲ گیگاپاسکال گزارش شد. مولایی و همکاران [24] در سال ۲۰۲۱ کاربید بور دوپ شده را مدل و خواص مکانیکی آن را استخراج کردند. با افزودن ۵ درصد اتم بور به ساختار کاربید بور در راستای آرمچیر، مدول یانگ و تنش در نقطهٔ شکست به‌ترتیب ٦٪ و ۱۹٪ کاهش یافت.

حضور نقص‌هایی با اشکال هندسی مختلف، تأثیر چشم‌گیری بر رفتارهای مکانیکی، حرارتی و... دارد. با ایجاد نقص و حذف شدن تعداد زیادی از اتم‌ها و مولکول‌ها و هم‌چنین وجود تمرکز تنش در لبه‌های نقص ایجاد شده، کاهش خواص مختلف مواد و ساختارهای گوناگون حاصل می‌شود. نصر اصفهانی و همکاران [25] با ایجاد عیوبی در مقیاس نانو، هدایت حرارتی گرافن را بررسی کردند. در حضور نقص بیضوی ٦ نانومتری، کاهش ۱۵٪ هدایت گرمایی مشاهده شد. آلبویه و همکاران [26] تأثیر نقص نقطه‌ای بر نانولولهٔ بور نیترید بااستفاده از نرم‌افزار لمپس (LAMMPS) در دو راستای زیگزاگ و آرمچیر مطالعه کردند. نتایج، بیشتر بودن مدول یانگ در راستای آرمچیر نسبت‌به زیگزاگ در همهٔ موارد را نشان داد. این اتفاق برای تنش و کرنش شکست، به‌جز یک مورد نیز صادق بود. لی و همکاران [27] با به‌کارگیری تحلیل دینامیک مولکولی، تابش لیزر بر میکروساختار سیلیکا را مطالعه کردند و دریافتند که در حضور نقص نیم‌کره، پیوندهای Si-Si آسان‌تر دچار دگرگونی می‌شوند. اسلام [28] تأثیر مرزدانه‌ها بر استحکام کششی و مقاومت شکست را در یک نمونهٔ پلی‌کریستال MoS_2 مطالعه کرد. در نمونه‌ای با مرزدانهٔ ۱۵ نانومتری، مقاومت کششی به‌اندازهٔ ۱۵/۷ گیگاپاسکال گزارش شد. هم‌چنین نتایج حاکی از تضعیف قابل توجه خواص مکانیکی این ساختار در اثر مرزدانه‌ها بود.

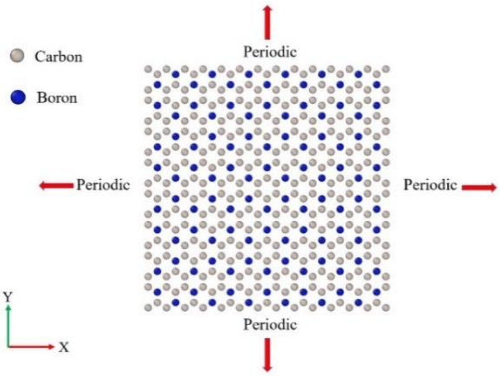
در این مقاله، یک مطالعهٔ عددی بر ساختار دوبعدی کاربید بور و بر پایهٔ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شد. خواص مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش در نقطهٔ شکست و کرنش در نقطهٔ شکست در راستای زیگزاگ محاسبه شدند. در ابتدا، تأثیر جایگاه نقص‌های دایروی با شعاع ثابت و در مکان‌های مختلف از ساختار مورد مطالعه قرار گرفت. سپس، تأثیر افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین بر روی ساختاری که بیشترین خواص مکانیکی را از خود نشان داد، مورد بررسی قرار گرفت.

روش‌های محاسبه

در این مقاله، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که یک فرایند مناسب برای جایگزین کردن روش‌های آزمایشگاهی می‌باشد، برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی کاربید بور استفاده شد. این روش براساس حرکات اتمی سیستم و تکامل دینامیکی از طریق حل عددی قانون دوم نیوتن و معادلات حاکم بر فیزیک کلاسیک بنا شده‌است [29]. موقعیت نقص دایروی و دماهای مختلف به‌عنوان دو المان تأثیرگذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. در این تحقیق، تمامی مدل‌سازی‌ها در نرم‌افزار لمپس انجام شدند [30]. شکل (۱) متغیر هندسی مورد استفاده را نشان می‌دهد. L به‌عنوان طول ساختار کاربید بور و x به‌عنوان فاصلهٔ مرکز نقص دایروی از ضلع جانبی ساختار بود. لازم به ذکر است که شعاع نقص دایروی (r) ثابت در نظر گرفته شد.



شکل ۱ شکل شماتیک نقص دایروی و مکان آن در مرکز ساختار کاربیدبور



شکل ۲ نمای بالا از تک لایه ساختار کاربید بور لانه زنبوری

شرایط مرزی دوره‌ای و پتانسیل بین اتمی از نقش اساسی برای محاسبهٔ نیروهای بین اتمی در شبیه‌سازی لمپس برخوردارند [31]. جهات زیگزاگ و آرمیچر در راستای محورهای X و Y در نظر گرفته شدند. از پتانسیل ترسوف برای به تصویر کشیدن فعل و انعالات بین اتم‌های بور و کربن و هم‌چنین تعامل پیوندها استفاده شد [32]. پتانسیل ترسوف یکی از مناسب‌ترین و پرکاربردترین پتانسیل‌ها برای مدل‌سازی‌های خواص مکانیکی و حرارتی مواد مختلفی از جمله گرافن، کاربید بور، تنگستن دی‌سولفات و دیگر شبکه‌های کربن دوبعدی استفاده شده‌است [23]. بعد از آن، در طی شبیه‌سازی انرژی جنبشی و پتانسیل سیستم و هم‌چنین انرژی کل آن به پایداری قابل قبولی رسید. در طول فرایند شبیه‌سازی، ساختارها تحت شرایط NPT به تعادل رسید و صفحهٔ یکپارچه‌ای با ابعاد ۲۰۰A × ۲۰۰A تشکیل شد که تحت بارگذاری کششی محوری قرار گرفت. هم‌چنین، الگوریتم سرعت برای حل معادلات حرکت ذرات با گام زمانی ps ۰/۰۰۱ استفاده شد. در این ساختارهای مورد بررسی دارای ۱۳۳۷۶ اتم بودند. برای ایجاد نقص در ساختار، ابتدا نقص با هندسه مورد نظر را ایجاد و بعد با بهره‌گیری از دستور "delete atom" نقص در محل مورد نظر ایجاد شد. در نهایت روند شکست و پیکربندی اتمی و تجسم ساختار با نرم‌افزار OVITO انجام شد [33]. شکل (۲) نشان‌دهندهٔ ساختار کاربید بور می‌باشد که هر اتم بور (آبی رنگ) توسط سه اتم کربن (خاکستری رنگ) احاطه شده‌اند.

مدول یانگ که شـــیب قســـمت خطی نمودار تنش- کرنش است، از رابطهٔ هوک محاسبه شد.

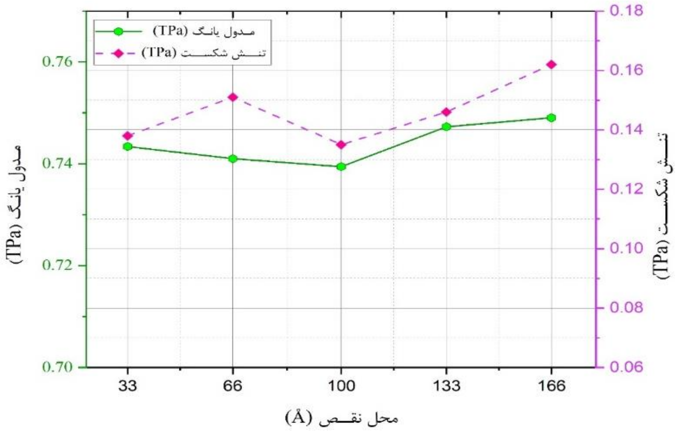
$$E = \sigma\varepsilon \tag{۱}$$

بحث و نتایج

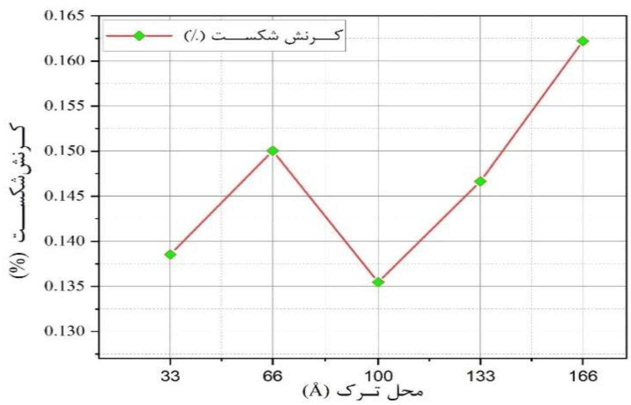
تأثیر موقعیت مکانی نقص دایروی. خواص مکانیکی کاربید بور اعم از مدول یانگ، تنش در نقطهٔ شکست و کرنش در نقطهٔ شکست اندازه‌گیری شدند. ابتدا برای یافتن بهترین موقعیت نقص دایروی، پنج موقعیت ۳۳، ٦٦، ۱۰۰، ۱۳۳ و ١٦٦ آنگستروم انتخاب شدند. شعاع نقص دایروی با مقدار ثابت ۱۵ آنگستروم در نظر گرفته شد. هم‌چنین، در بخش اول، دمای سیستم ۳۰۰ کلوین انتخاب شد. خواص مکانیکی یاد شده در جدول (۱) گزارش شده‌است. شایان ذکر است که مقدار مدول یانگ از قسمت خطی شیب نمودار تنش- کرنش به‌دست آمده‌است. با توجه به جدول (۱) تغییرات موقعیت مکانی نقص دایروی باعث تغییرات در خواص مکانیکی شده‌است. نتایج نشان می‌دهد، کم‌ترین مقدار خواص مکانیکی زمانی رخ داده‌است که نقص دایروی در مرکز صفحهٔ کاربید بور قرار دارد (حالت X_{100}). هم‌چنین، بیشترین مقدار خواص مکانیکی در موقعیت X_{166} گزارش شده‌است؛ مقدار مدول یانگ در دو موقعیت X_{66} به X_{166} از ۷٤۱/۰۱ گیگاپاسکال به ۷٤۹/۰٤ گیگاپاسکال رسیده‌است که نشان‌دهندهٔ افزایش ۱/۰۸٪ می‌باشد. این روند افزایشی برای خواص تنش و کرنش در نقطهٔ شکست نیز قابل ملاحظه است. باید اشاره کرد که در تنش‌های زیاد، نقص‌ها با کسب انرژی موجب می‌شوند تا اتم‌ها از حالت پایدار خود خارج شوند و رشد نقص اتفاق می‌افتد [34]. دادرسی و همکاران [32] تأثیر مسیر ترک را در صفحات گرافن مانند BC_3 تجزیه و تحلیل کردند. آن‌ها کاهش مدول یانگ و تنش شکست را در اثر افرایش طول نقص‌ها مشاهده کردند. روند تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست در شکل (۳ و ٤) قابل مشاهده می‌باشد. هم‌چنین برای تحلیل بهتر تأثیر موقعیت مکانی نقص دایروی در ساختار کاربید بور در راستای زیگزاگ، نمودار تنش- کرنش هر پنج نمونه در شکل (۵) ارائه شده‌است.

جدول ١ خواص مکانیکی صفحهٔ کاربید بور در دمای ٣٠٠ کلوین و پنج موقعیت مختلف نقص دایروی

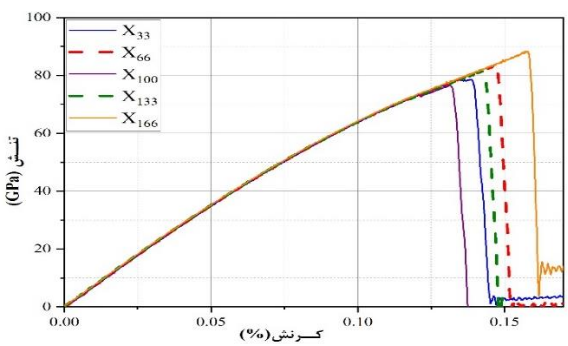
موقعیت (Å)	مدول یانگ (GPa)	تنش شکست (GPa)	کرنش شکست (%)	درصد افزایش مدول یانگ	درصد افزایش تنش شکست	درصد افزایش کرنش شکست
X_{33}	٧٤٣/٤١	٧٨/٧٣	٠/١٣٨	مبنا	مبنا	مبنا
X_{66}	٧٤١/٠١	٨٣/٣٣	٠/١٥١	-٣/٢٢	٠/٠٥	٠/٠٩
X_{100}	٧٣٩/٤٥	٧٦/٨١	٠/١٣٥	-٥/٣٢	-٠/٠٢	-٠/٠٢
X_{133}	٧٤٧/٢٨	٨١/٥٣	٠/١٤٦	٥/٣٤	٠/٠٣	٠/٠٥
X_{166}	٧٤٩/٠٤	٨٨/٤١	٠/١٦٢	٧/٥٧	٠/١٢	٠/١٧



شکل ٣ تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست ساختار کاربید بور برای موقعیت‌های مکانی مختلف نقص دایروی



شکل ٤ تغییرات کرنش در نقطهٔ شکست ساختار کاربید بور برای موقعیت‌های مکانی مختلف نقص دایروی

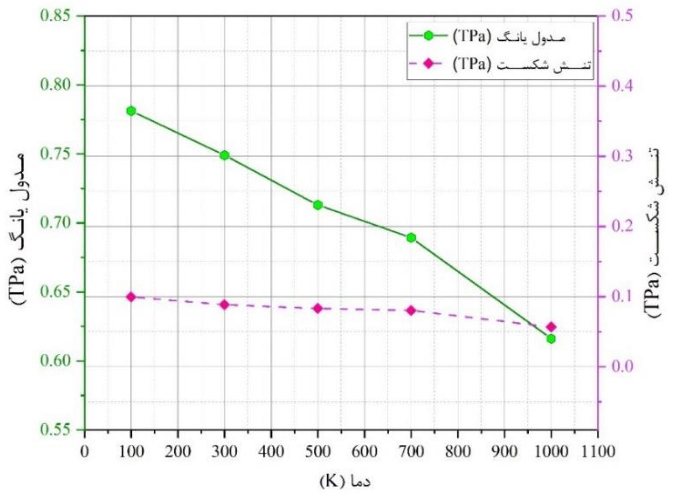


شکل ٥ نمودار تنش- کرنش ساختار کاربید بور در راستای زیگزاگ و در حضور پنج موقعیت مختلف نقص دایروی

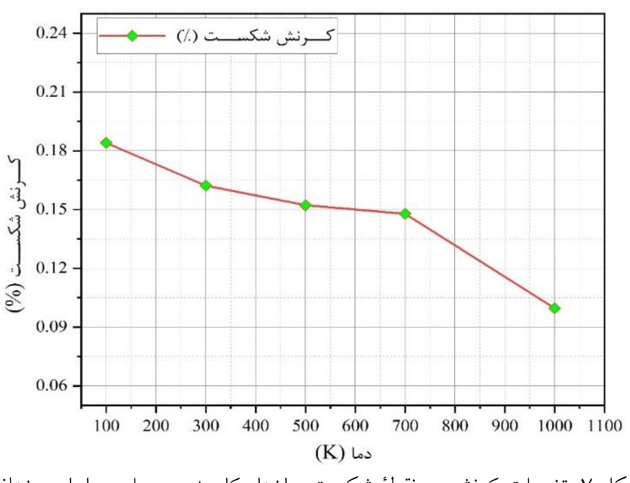
تأثیر دما بر خواص مکانیکی با موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی. در این بخش، به‌منظور بررسی افزایش دما بر خواص مکانیکی ساختار یاد شده، تأثیر پنج دمای مختلف ۱۰۰، ۲۰۰، ۳۰۰، ۷۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین بر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست ساختار کاربید بور مورد بررسی قرار گرفت. شایان ذکر است به‌دلیل نتایج بهتر نمونهٔ X_{166} در بخش قبل، تغییرات دما برای این نمونه بررسی شد. تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست در جدول (۲) گزارش شده‌است. هم‌چنین شکل (۶ و ۷) تغییرات هر سه خاصیت مکانیکی را برای ساختار کاربید بور به نمایش گذاشته‌است.

جدول ۲ خواص مکانیکی صفحهٔ کاربید بور در دماهای مختلف و موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی

مدول یانگ (GPa)	تنش شکست (GPa)	کرنش شکست (%)	دما (K)
۷۸۱/۲۱	۹۹/۵۹	۰/۱۸٤	۱۰۰
۷٤۹/۰٤	۸۸/٤۱	۰/۱٦۲	۳۰۰
۷۱۲/۹۸	۸۳/۱٦	۰/۱۵۲	۵۰۰
٦۸۹/۳۳	۸۰/۳۰	۰/۱٤۷	۷۰۰
٦۱٦/۱۹	٥٦/۷۱	۰/۰۹	۱۰۰۰



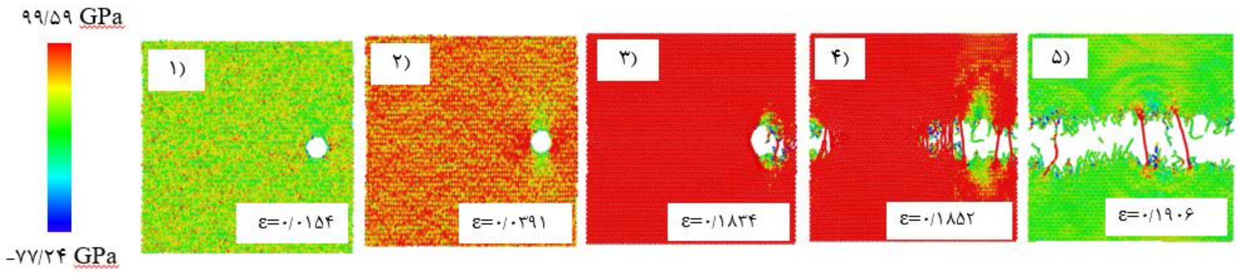
شکل ٦ تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست ساختار کاربید بور برای دماهای مختلف



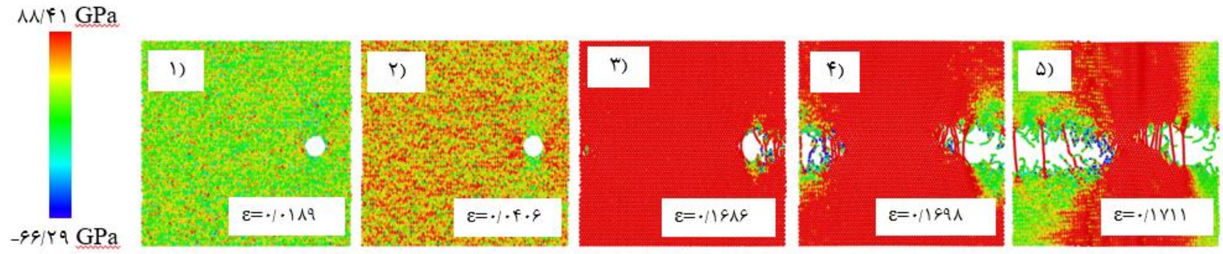
شکل ۷ تغییرات کرنش در نقطهٔ شکست ساختار کاربید بور برای دماهای مختلف

همان‌طور که قابل مشاهده است، با افزایش دما، خواص مکانیکی کاهش می‌یابد. به‌عنوان نمونه، مقدار مدول یانگ از ۷۸۱/۲۱ گیگاپاسکال برای دمای ۱۰۰ کلوین به ۷٤۹/۰٤، ۷۱۲/۹۸، ٦۸۹/۳۳ و ٦۱٦/۱۹ گیگاپاسکال به‌ترتیب برای دماهای ۳۰۰، ۵۰۰، ۷۰۰ و ۱۰۰۰ رسیده‌است که به‌ترتیب ٤/۱۱٪، ۸/۷۳٪، ۱۱/۷٦٪ و ۲۱/۱۲٪ کاهش را نشان می‌دهد. این نکته قابل ذکر است که در مقیاس اتمی، افزایش دما باعث تضعیف پیوند شیمیایی می‌شود. از آن‌جایی که پیوند شیمیایی عاملی اثرگذار بر خواص مکانیکی است، افزایش دما موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد [23]. تحقیقات مختلفی مبنی‌بر تأثیر دما بر خواص مکانیکی شده‌است؛ دهقانی و همکاران اثر افزایش دما را بر خواص مکانیکی ساختار برلیوم اکساید مورد آزمایش قرار دادند. آن‌ها بااستفاده از دماهای گوناگون نشان دادند که افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین، موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد [35].

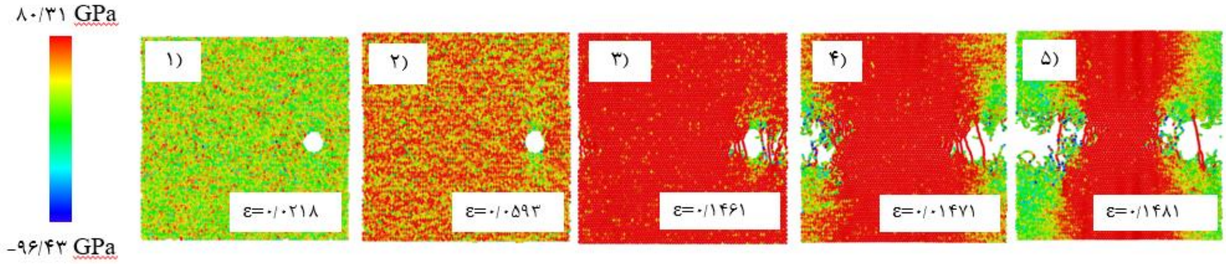
تنش در نقطهٔ شکست نیز روند نزولی را از خود نشان می‌دهد. مقدار این خاصیت مکانیکی از ۹۹/۵۹ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۵٦/۷۱ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافته‌است که نشان‌دهندهٔ روند کاهشی به‌میزان ۵۷/٦۱ ٪ می‌باشد. با اعمال نیروی کششی به ساختار، انرژی جنبشی به انرژی کرنشی تبدیل می‌شود و در دماهای بالا با افزایش انرژی جنبشی، انرژی کرنشی کاهش می‌یابد و منجر به کاهش تنش بیشینه می‌شود [34 , 33]. این روند نزولی می‌تواند به‌دلیل کم شدن انرژی برخورد بین اتمی و هم‌چنین افزایش فاصلهٔ اتم‌ها در اثر افزایش دما باشد [35]. این سیر نزولی در خاصیت کرنش در نقطهٔ شکست نیز قابل مشاهده است.



شکل ۸ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۱۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی ($X_{۱٦٦}$)



شکل ۹ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۳۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی ($X_{۱٦٦}$)



شکل ۱۰ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۷۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی ($X_{۱٦٦}$)

شکل‌های (۱۰-۸) روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور را برای سه دمای مختلف نشان می‌دهد. هر سه نمونه برای موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی ($X_{١٦٦}$) می‌باشد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش کرنش، تمرکز تنش در اطراف نقص بیشتر می‌شود که همین امر موجب ایجاد شکست در ساختار می‌گردد. این روند تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که مقاومت ساختار کاربید بور به کم‌ترین مقدار خود برسد و صفحه از هم گسیخته شود. نکتهٔ مهم دیگری که باید به آن توجه داشت این است که با افزایش دما، ساختار مورد بررسی در کرنش کم‌تری به نقطهٔ شکست می‌رسد. نتایج نشان می‌دهد که افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۷۰۰ کلوین، تأثیر به‌سزایی بر خواص مکانیکی مورد بررسی داشته‌است. باتوجه به شکل‌های (۸- ۱۰) و جدول (۲) شکست در ساختار کاربید بور به‌ترتیب در ۰/۱۹۱ و ۰/۱۷۱ و ۰/۱٤۸ درصد رخ داده‌است. گسترش و رشد عیوب به معنی گسستن پیوندهای بین بور- کربن و کربن- کربن می‌باشد. دادرسی و همکاران [36] تأثیر دما بر پاسخ مکانیکی ساختار کاربید بور را بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش دما و افزایش طول ترک خواص مکانیکی کاربید بور را کاهش می‌دهد. با انتشار فضاهای خالی می‌توان انتظار نوسان در تنش را داشت که این امر موجب تمرکز تنش در اطراف نقوص می‌گردد [37-39]. شایان ذکر است که تمرکز تنش در اطراف نقص‌های ایجاد شده در ساختار را می‌توان به‌عنوان یکی از عوامل اصلی کاهش خواص مکانیکی برشمرد [40, 41].

جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار دوبعدی کاربید بور با کمک روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. دو المان موقعیت مکانی نقص دایروی و تغییرات دما به‌عنوان پارامترهای اثرگذار بر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطهٔ شکست ساختار در راستای زیگزاگ مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج به‌دست آمده نشان داد که حضور نقص دایروی باعث تغییرات خواص مکانیکی گردید و هرچه مکان آن از لبه‌های ساختار به مرکز ساختار نزدیک شد، کاهش خواص مکانیکی را به دنبال داشت. در گام بعدی، تأثیر پنج دمای مختلف ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به‌دست‌آمده حاکی از آن بود که افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شد. نتایج به‌دست‌آمده نشان از کاهش ۲۱/۱۲ ٪ مدول یانگ داشت. هم‌چنین مقدار تنش و کرنش در نقطهٔ شکست دمای ۱۰۰۰ کلوین به‌ترتیب به‌میزان ٤۳/۰٥ ٪ و ٤٦/۱۹٪ نسبت‌به دمای ۱۰۰ کلوین کاهش یافت.

واژه نامه

پلی‌کریستال	Polycrystalline
دوپ شده	Doped
شرایط مرزی دوره‌ای	Periodic boundry condtion
مقاومت کششی	Tensile strength
نقص	Defect
تنش شکست	Failure stress
کرنش شکست	Failure strain
دما	Temperature
خواص مکانیکی	Mechanical properties

مراجع

1. Bondarev, A. V., Fraile, A., Polcar, T., and Shtansky, D. V., "Mechanisms of Friction and Wear Reduction by H-BN Nanosheet and Spherical W Nanoparticle Additives to Base Oil: Experimental Study and Molecular Dynamics Simulation", *Tribology International*, Vol. 151, Pp. 106493, (2020).
2. Aghdasi, P., Ansari, R., Rouhi, S., Yousefi, S., Goli, M., and Soleimani, H.,"Investigating Elastic and Plastic Characteristics of Monolayer Phosphorene under Atomic Adsorption by the Density Functional Theory", *Physica B: Condensed Matter*, Vol. 600, Pp. 412603, (2021).
3. Takari, A., Ghasemi, A. R., Hamadanian, M., Sarafrazi, M., and Najafidoust, A. "Molecular Dynamics Simulation and Thermo-Mechanical Characterization for Optimization of Three-Phase Epoxy/TiO_2/SiO_2 Nano-Composites", *Polymer Testing*, Vol. 93, Pp. 106890, (2021).

4. Sunnardianto, G. K., Bokas, G., Hussein, A., Walters, C., Moultos, O. A., and Dey, P., "Efficient Hydrogen Storage in Defective Graphene and its Mechanical Stability: A Combined Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulation Study", *International journal of Hydrogen energy*, Vol. 46, Pp. 5485-5494, (2021).
5. Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., and Firsov, A. A., "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", *Science*, Vol. 306, Pp. 666-669, (2004).
6. Rajabi, M., Zarei, D., Rashed, Gh. R., "An overview of the structure and properties of polymer / graphene nanocomposites," Journal of Studies in the World of Color, Vol. 2, 23001, (2012) (In Persian).
7. Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., and Hone, J., "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene", *Science*, Vol. 321, Pp. 385-388, (2008).
8. Yu Q., Jauregui, L. A., Wu W., Colby R., Tian J., Su Z., Cao H., Liu Z., Pandey D., and Wei D., "Control and Characterization of Individual Grains and Grain Boundaries in Graphene Grown by Chemical Vapour Deposition", *Nature Materials*, Vol. 10, Pp. 443-449, (2011).
9. Kim, K. S., Zhao, Y., Jang, H., Lee, S. Y., Kim, J. M., Kim, K. S., ... & Hong, B. H. Kim, K. S., Zhao, Y., Jang, H., Lee, S. Y., Kim, J. M., Kim, K. S., & Hong, B. H., "Large-Scale Pattern Growth of Graphene Films for Stretchable Transparent Electrodes", *Nature*, Vol. 457, Pp. 706-710, (2009).
10. Grieshammer, S., Momenzadeh, L., Belova, I. V., and Murch, G. E., "Ionic and Thermal Conductivity of Pure and Doped Ceria by Molecular Dynamics", *Solid State Ionics*, Vol. 355, Pp. 115424, (2020).
11. Zamani, S. M. M., and Behdinan, K., "A Molecular Dynamics Study of the Mechanical and Electrical Properties of Polydimethylsiloxane-Ni Conductive Nanocomposites", *Composites Science and Technology*, Vol. 200, Pp. 108463, (2020).
12. Djaili, S., Gueddim, A., Guibadj, A., and Bouarissa, N., "Temperature Dependence of the Optical Properties of MgO: Ab Initio Molecular Dynamics Calculations", *Optik*, Vol. 200, Pp. 163421, (2020).
13. Islam, M., Thakur, M. S. H., Mojumder, S., Al Amin, A., and Islam, M. M., "Mechanical and vibrational characteristics of functionally graded Cu–Ni nanowire: a molecular dynamics study," *Composites Part B: Engineering*, Vol. 198, Pp. 108212, (2020).
14. Thevenot, F. (1991). "A review on boron carbide." Pp. 59-88.
15. Domnich, V., Reynaud, S., Haber, R. A., and Chhowalla, M., "Boron carbide: structure, properties, and stability under stress," *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 94, Pp. 3605-3628, (2011).
16. Werheit, H., "Boron-rich solids: a chance for high-efficiency high-temperature thermoelectric energy conversion," *Materials Science and Engineering: B*, Vol. 29, Pp. 228-232, (1995).
17. Emin, D., "Unusual properties of icosahedral boron-rich solids," *Journal of Solid State Chemistry*, Vol. 179, Pp. 2791-2798, (2006).
18. Tanaka, H., Kawamata, Y., Simizu, H., Fujita, T., Yanagisawa, H., Otani, S., and Oshima, C., "Novel macroscopic BC_3 honeycomb sheet," Solid state communications, Vol. 136, Pp. 22-25, (2005).
19. Rao B. S., "*Ceramic Powders for High-tech Applications*", Universities Press, (1995).
20. Durandurdu M., "Ab initio simulation of amorphous BC_3," Computational Materials Science, Vol. 178, Pp. 109622, (2020).
21. Mrudul, M. S., Thomas, S., and Ajith, K. M., "Anharmonicities in the temperature-dependent bending rigidity of BC_3 monolayer," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 146, Pp. 109574, (2020).
22. Korotaev, P., Pokatashkin, P., and Yanilkin, A., "The role of non-hydrostatic stresses in phase transitions in boron carbide," *Computational Materials Science*, Vol. 121, Pp. 106-112, (2016).

23. Zahedi, R. K., Shirazi, A. H. N., Alimouri, P., Alajlan, N., and Rabczuk, T., "Mechanical properties of graphene-like BC_3; a molecular dynamics study," *Computational Materials Science,* Vol. 168, Pp. 1-10, (2019).
24. Molaei, F., Eshkalak, K. E., Sadeghzadeh, S., and Siavoshi, H., "Assessing mechanical properties of single-layer B-doped C_3N and N-doped BC_3 nanosheets and their hybrid," *Computational Materials Science,* Vol. 192, Pp. 110368, (2021).
25. Esfahani, M. N., Jabbari, M., Xu, Y., and Soutis, C., "Effect of nanoscale defects on the thermal conductivity of graphene," *Materials Today Communications,* Vol. 26, Pp. 101856, (2021).
26. Albooyeh, A. R., Dadrasi, A., and Mashhadzadeh, A. H., "Effect of point defects and low-density carbon-doped on mechanical properties of BNNTs: A molecular dynamics study," *Materials Chemistry and Physics,* Vol. 239, Pp. 122107, (2020).
27. Li, L., Zhang, M. W., and Zhao, Z. Z., "Molecular dynamics analysis of the effect of laser and defects on the micro-structure of fused silica," *Journal of Electronic Science and Technology,* Vol. 18, Pp. 100045, (2020).
28. Islam, Z., and Haque, A., "Defects and grain boundary effects in MoS_2: A molecular dynamics study," *Journal of Physics and Chemistry of Solids,* Vol. 148, Pp. 109669, (2021).
29. Zhang, Y., and Huang, H., "Stability of single-wall silicon carbide nanotubes–molecular dynamics simulations," *Computational Materials Science,* Vol. 43, Pp. 664-669, (2008).
30. Prieve, D. C., and Russel, W. B., "Simplified predictions of Hamaker constants from Lifshitz theory," *Journal of Colloid and Interface Science,* Vol. 125, no. 1, Pp. 1-13, (1988).
31. Byggmästar, J., Hodille, E. A., Ferro, Y., and Nordlund, K., "Analytical bond order potential for simulations of BeO 1D and 2D nanostructures and plasma-surface interactions," *Journal of Physics: Condensed Matter,* Vol. 30, Pp. 135001, (2018).
32. Dadrasi, A., Fooladpanjeh, S., Eshkalak, K. E., Sadeghzadeh, S., and Saeb, M. R., "Crack Pathway Analysis in Graphene-Like BC3 Nanosheets: Towards a Deeper Understanding", *Journal of Molecular Graphics and Modelling,* Vol. 107, Pp. 107980, (2021).
33. Stukowski, A., "Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO–the Open Visualization Tool", *Modelling and simulation in materials science and engineering,* Vol. 18, Pp. 015012, (2009).
34. Mortazavi, B., Ahzi, S., Toniazzo, V. and Rémond, Y., "Nitrogen Doping and Vacancy Effects on the Mechanical Properties of Graphene: A Molecular Dynamics Study", *Physics Letters A,* Vol. 376, Pp. 1146-1153, (2012).
35. Fang, T., Chang, W. and Yang, J. C., "Temperature Effect on Mechanical Properties of Graphene Sheets under Tensile Loading", *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures,* Vol. 7, Pp. 1811-1816, (2012).
36. Dadrasi, A., Fooladpanjeh, S., Albooyeh, A., Salmankhani, A., Mashhadzadeh, A. H. and Saeb, M. R., "A Theoretical Insight into the Fracture Behavior of the Edge-Cracked Polycrystalline BC_3 Nanosheets", *Computational Materials Science,* Vol. 192, Pp. 110345, (2021).
37. Dehaghani, M. Z., Mashhadzadeh, A. H., Salmankhani, A., Karami, Z., Habibzadeh, S., Ganjali, M. R., & Saeb, M. R., "Fracture Toughness and Crack Propagation Behavior of Nanoscale Beryllium Oxide Graphene-Like Structures: A Molecular Dynamics Simulation Analysis", *Engineering Fracture Mechanics,* Vol. 235, Pp. 107194, (2020).
38. Li, J., Dong, L., Xie, H., Meng, W., Zhang, X., Zhang, J. and Zhao, W., "Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation Mechanism of Polycrystalline Titanium under Tension Deformation in Nanoscale", *Materials Today Communications,* Vol. 26, Pp. 101837, (2021).
39. Chang, X., Ji, Y., and Li, H., "Mechanical Properties of PtS_2 Monolayer with Rectangular Defects: A Molecular Dynamics Study", *Computational Materials Science,* Vol. 196, Pp. 110552, (2021).

40. Guo, F. L., Tan, D., Wu, T., Huang, P., Li, Y. Q., Hu, N., and Fu, S. Y., "Experimental Characterization and Molecular Dynamics Simulation of Thermal Stability, Mechanical Properties and Liquid Oxygen Compatibility of Multiple Epoxy Systems for Cryotank Applications", *Extreme Mechanics Letters,* Vol. 44, Pp. 101227, (2021).
41. Chowdhury, E. H., Rahman, M. H., Fatema, S., and Islam, M. M., "Investigation of the Mechanical Properties and Fracture Mechanisms of Graphene/WSe2 Vertical Heterostructure: A Molecular Dynamics Study", *Computational Materials Science,* Vol. 188, Pp. 110231, (2021).